

# POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

## KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2020/2021

Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki

Kierunek studiów: Fizyka Techniczna

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: FT

Stopień studiów: I

Specjalności: Fizyka medyczna, Modelowanie komputerowe, Nowoczesne materiały i nanotechnologie, Technologie multimedialne

### 1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Projektowanie układów molekul.
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	Design of molecular systems
KOD PRZEDMIOTU	WIMiF FT oIS B11 20/21
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty podstawowe
LICZBA PUNKTÓW ECTS	4.00
SEMESTRY	3

### 2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

SEMESTR	WYKŁAD	ĆWICZENIA	LABORATORIUM	LABORATORIUM KOMPUTERO- WE	SEMINARIUM	PROJEKT
3	15	15	0	15	0	0

### 3 CELE PRZEDMIOTU

**Cel 1** Zapoznanie studentów z praktycznym wykorzystaniem metod fizyki i chemii kwantowej w praktyce, a szczególności z ich wykorzystaniem do modelowania struktur molekularnych.

**Cel 2** Praktyczne zapoznanie studentów z profesjonalnym oprogramowaniem numerycznym do projektowania struktur molekularnych.

## 4 WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

1 Znajomość podstawowych zagadnień z chemii

## 5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

**EK1 Wiedza** Student potrafi zbudować w programie HyperChem związek niskocząsteczkowy w 2D i 3D potrafi wyznaczyć długości i kąty wiązań, rozkład ładunku oraz współrzędne geometryczne.

**EK2 Wiedza** Student potrafi przeprowadzić optymalizację geometryczną wybranej molekuly metodami AM1i PM3. Obliczyć momenty dipolowe i poziomy energetyczne HOMO i LUMO moelkuł.

**EK3 Wiedza** Student potrafi zaprojektować trajektorię molekularno-dynamiczna w wybranej temperaturze

**EK4 Wiedza** Modelowanie polipeptydów. Korzystanie z bazy danych. Porównanie struktur dwóch polipeptydów. Mutacje punktowe.

## 6 TREŚCI PROGRAMOWE

LABORATORIUM KOMPUTEROWE		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
K1	Zapoznanie z programem HyperChem. Konstrukcja wejściowych i wyjściowych pakietów obliczeniowych. Budowanie prostych cząsteczek w 2D i 3D. Pomiar właściwości strukturalnych cząsteczek; długości i kąty wiązań, rozkład ładunku, współrzędne geometryczne. Optymalizacja geometrii cząsteczek w wybranym polu siłowym. Wyznaczenie energii z wykorzystaniem metody półempirycznej. Analiza konformacyjna wybranych cząsteczek. Obliczanie momentów dipolowych w cząsteczkach oraz poziomów energetycznych HOMO i LUMO. Dynamika molekularna - projektowanie trajektorii molekularno-dynamicznej w dwóch wybranych temperaturach	15

ĆWICZENIA		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
C1	Rozwiązywanie zagadnień dotyczących tematyki wykładu	15

WYKŁAD		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN

WYKŁAD		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
W1	Omówienie następujących zagadnień : Metody półempiryczne, ab initio oraz funkcjonałów gęstości elektronowej (DFT- density functional theory) podstawy teoretyczne ze szczególnym uwzględnieniem metod AM1 i PM3, Oddziaływanie konfiguracyjne, poziomy energetyczne HOMO i LUMO, Mechanika molekularna i kwantowa, Optymalizacja geometryczna, Dynamik molekularna, Widma absorpcji i fotoluminescencji	15

## 7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1 Wykłady

N2 Ćwiczenia projektowe

N3 Dyskusja

N4 Konsultacje

N5 Zadania tablicowe

## 8 OBCIĄŻENIE PRACĄ STUDENTA

FORMA AKTYWNOŚCI	ŚREDNIA LICZBA GODZIN NA ZREALIZOWANIE AKTYWNOŚCI
<b>Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym:</b>	
Godziny wynikające z planu studiów	45
Konsultacje przedmiotowe	20
Egzaminy i zaliczenia w sesji	5
<b>Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym:</b>	
Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury	20
Opracowanie wyników	10
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	20
<b>SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA</b>	<b>120</b>
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU	4.00

## 9 SPOSOBY OCENY

### OCENA FORMUJĄCA

F1 Odpowiedź ustna

F2 Projekt indywidualny

### OCENA PODSUMOWUJĄCA

P1 Średnia ważona ocen formujących

### KRYTERIA OCENY

EFEKT KSZTAŁCENIA 1	
NA OCENĘ 3.0	opanowanie w 60% omawianego zagadnienia.
EFEKT KSZTAŁCENIA 2	
NA OCENĘ 3.0	opanowanie w 60% omawianego zagadnienia.
EFEKT KSZTAŁCENIA 3	
NA OCENĘ 3.0	opanowanie w 60% omawianego zagadnienia.
EFEKT KSZTAŁCENIA 4	
NA OCENĘ 3.0	opanowanie w 60% omawianego zagadnienia.

## 10 MACIERZ REALIZACJI PRZEDMIOTU

EFEKT KSZTAŁCENIA	ODNIESIENIE DANEGO EFEKTU DO SZCZEGÓLOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU	CELE PRZEDMIOTU	TREŚCI PROGRAMOWE	NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE	SPOSOBY OCENY
EK1	K_W02 K_W04 K_W06 K_W18	Cel 1 Cel 2	K1 C1 W1	N1 N2 N3 N4 N5	F1 F2 P1
EK2	K_W02 K_W04 K_W06 K_W18	Cel 1 Cel 2	K1 C1 W1	N1 N2 N3 N4 N5	F1 F2 P1
EK3	K_W02 K_W05 K_W06 K_W18	Cel 1 Cel 2	K1 C1 W1	N1 N2 N3 N4 N5	F1 F2 P1

EFEKT KSZTAŁCENIA	ODNIESIENIE DANEGO EFEKTU DO SZCZEGÓŁOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU	CELE PRZEDMIOTU	TREŚCI PROGRAMOWE	NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE	SPOSOBY OCENY
EK4	K_W02 K_W04 K_W05 K_W06 K_W07 K_W09b K_W18	Cel 1 Cel 2	K1 C1 W1	N1 N2 N3 N4 N5	F1 F2 P1

## 11 WYKAZ LITERATURY

### LITERATURA PODSTAWOWA

- [1 ] Włodzimierz Kołos — *Chemia Kwantowa*, Warszawa, 1978, PWN  
 [2 ] Peter William Atkins — *Chemia Fizyczna*, Warszawa, 2003, PWN

## 12 INFORMACJE O NAUCZYCIELACH AKADEMICKICH

### OSOBA ODPOWIEDZIALNA ZA KARTĘ

dr hab. Ewa Gondek (kontakt: egondek@pk.edu.pl)

### OSOBY PROWADZĄCE PRZEDMIOT

1 dr hab. Ewa Gondek (kontakt: egondek@pk.edu.pl)

## 13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

(miejsowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....